# Index

Pagina

*Commentationes, Relationes et Annotationes*


DE ALTI, G., see GALASSO, V., and A. BIGOTTO . . . . . 222
ANDRÉ, J. M., et G. LEROY: Etude théorique d'une chaine polyénique infinie par la méthode LCAO-SCF-CO . . . . . 123
ARMSTRONG, D. R., and P. G. PERKINS: Calculation of $\sigma \rightarrow \pi^*$ and $\pi \rightarrow \sigma^*$ Transitions in Vinylboranes . . . . . 412

BAIRD, N. C., and M. J. S. DEWAR: Ground States of $\sigma$-Bonded Molecules. III. Valence-Shell and $\pi$-Electron SCF MO Calculations for Conjugated Hydrocarbons . . . . . 1
BANDO, Y., and S. NAGAKURA: The Electronic Structure and Spectrum of the Silver (I) Perchlorate-Pyridine Complex . . . . . 210
BARBIER, C., et G. BERTHIER: Théorie excitonique des constantes de couplage nucléaires dans les molécules organiques . . . . . 92
BERTHIER, G., voir BARBIER, C. . . . . 92
—, voir GELUS, M., et P.-M. Vay . . . . . 182
BIGOTTO, A., see GALASSO, V., and G. DE ALTI . . . . . 222
BINGEL, W. A.: A Physical Interpretation of the Cusp Conditions for Molecular Wave Functions . . . . . 99
BUENKER, R. J., see PEYERIMHOFF, S. D. . . . . 103

CHAKRAVARTY, A. S., see KÖNIG, E. . . . . 151
—, see KÖNIG, E. . . . . 171
COHEN, M., B. H. DORRELL, and R. P. MCEACHRAN: Simple Accurate Two-Centre Wave-Functions for Homonuclear Diatomic Molecules . . . . . 324
COHEN, M., B. H. DORRELL, and R. P. MCEACHRAN: Approximate Wave Functions for Excited States: Energies and Dipole Moments of the $2p\sigma$ State of $HeH^{+2}$ . . . . . 382

DAVIES, D. W.: An Extension of the Least Squares Local Energy Method to Perturbed Systems . . . . . 330
DEDIEU, P., see FIGEYS, H. P. . . . . 82
DEWAR, M. J. S., see BAIRD, N. C. . . . . 1
DITCHFIELD, R., G. T. JONES, and J. N. MURRELL: The Mechanism of Long-Range Proton-Proton Coupling . . . . . 253
DORRELL, B. H., see COHEN, M., and R. P. MCEACHRAN. . . . . 324
—, see COHEN, M., and R. P. MCEACHRAN. . . . . 382
DUKE, B. J.: The Iterative Extended Hückel Method (IEHM) . . . . . 260

MCEACHRAN, R. P., see COHEN, M., and B. H. DORRELL . . . . . 324
—, see COHEN, M., and B. H. DORRELL . . . . . 382

FABIAN, J., A. MEHLHORN u. G. TRÖGER: MO-LCAO-Berechnungen an schwefelhaltigen $\pi$-Elektronensystemen. XI. Die Elektronenstruktur des Mercaptobenzols . . . 140
FIGEYS, H. P., and P. DEDIEU: An Improved Semi-empirical Hückel-Method for the Study of Physico-Chemical Properties of Aromatic Systems . . . . . 82
FLURRY, Jr., R. L.: S.C.M.O. $\pi$-Electron Calculations of the Spectra and Ionization Potentials of Some Methyl Substituted Benzenes . . . . . 96
FORSHEY, D. R., see PUKANIC, G. W., BR. J. D. WEGENER, and J. B. GREENSHIELDS . . 38
—, PUKANIC, G. W., BR. J. D. WEGENER, and J. B. GREENSHIELDS: LCAO-MO-SCF-CI Semi-Empirical $\pi$-Electron Calculations on Heteroaromatic Systems. II. Amino Aromatic Compounds . . . . . 288

GALASSO, V., G. DE ALTI, and A. BIGOTTO: Electronic Structure and Absorption Spectra of Indolizines . . . . . 222

Pagina

GANACHAUD, J. P., voir GUERILLOT, C. R., et R. LISSILLOUR . . . . . 230
—, voir GUERILLOT, C. R., et R. LISSILLOUR . . . . . 375
GELLER, M.: Comment on the Kinetic Energy Components of LCAO-Molecular Orbitals by HAROLD BAUMANN and EDGAR HEILBRONNER . . . . . 197
GELUS, M., P.-M. VAY et G. BERTHIER: Structure électronique et stabilité thermique d'hétérocycles appartenant à la serie de l'imidazole et du thiazole . . . . . 182
GIESSNER-PRETTRE, C., and A. PULLMAN: All Valence-Electrons Calculations of the Biological Purines and Pyrimidines. I. CNDO Calculation . . . . . 279
MCGLYNN, S. P., see VANQUICKENBORNE, L. G. . . . . 390
GREENSHIELDS, J. B., see PUKANIC, G. W., D. R. FORSHEY, and BR. J. D. WEGENER . . 38
—, see D. R. FORSHEY, G. W. PUKANIC, and BR. J. D. WEGENER . . . . . 288
GUERILLOT, C. R., J. P. GANACHAUD et R. LISSILLOUR: Evaluation des facteurs de diffusion bicentriques par la méthode de la fonction zeta . . . . . 230
— — — Calcul des facteurs de diffusion polycentriques sur une base de fonctions Gaussiennes . . . . . 375

HANSEN, K. H.: Application of Variation Perturbation Theory to Some One-Center Problems of Quantum Chemistry . . . . . 296
HARRISS, D. K., and R. K. ROUBAL: Nonlinear Parameters in the Least-Squares Local Energy Method. I. $\sigma$-States of $HeH^{++}$ . . . . . 303
HENSEN, K., u. K. P. MESSER: Spektroskopische und theoretische Untersuchungen am Borazolmolekül und seinen Bortrihalogenoderivaten . . . . . 17
HERAK, J. N., and N. TRINAJSTIĆ: Free Valence Indices of Carbon in Heterocyclic Compounds . . . . . 333

JONES, G. T., see DITCHFIELD, and J. N. MURRELL . . . . . 253
JORDAN, F., and B. PULLMAN: Molecular Orbital Calculations on the Preferred Conformation of Nucleosides . . . . . 242
JUNGEN, M., u. H. LABHART: Zur Wechselwirkung von $\pi$- und $\sigma$-Elektronen in der Theorie ungesättigter Moleküle. I. Semiempirische LCAO-SCF-Rechnungen für $\pi$- und $\sigma$-Orbitale von Acrolein und Furan . . . . . 345
— — Zur Wechselwirkung von $\pi$- und $\sigma$-Elektronen in der Theorie ungesättigter Moleküle. II. Die $\pi$-$\sigma$-Wechselwirkung in der Pariser-Parr-Pople-Näherung . . . . . 366

KLESSINGER, M.: Nichtnachbar-Matrixelemente in der HMO-Methode . . . . . 339
KÖNIG, E., and A. S. CHAKRAVARTY: Magnetic Properties of Transition Metal Ion Cubic $^5T_2$ Terms in Axial Ligand Fields. I. Magnetic Anisotropy and Principal Magnetic Susceptibilities . . . . . 151
— — Magnetic Properties of Transition Metal Ion Cubic $^5T_2$ Terms in Axial Ligand Fields. II. Average Magnetic Susceptibility . . . . . 171
KUNII, T. L., see KURODA, H. . . . . 51
KURODA, H., and T. L. KUNII: SCF MO CI Calculations on the Electronic Spectra of Fluorenone and Related Compounds . . . . . 51
KUTZELNIGG, W., s. STAEMMLER, V. . . . . 67

LABHART, H., s. JUNGEN, M. . . . . 345
—, s. JUNGEN, M. . . . . 366
LEHN, J. M., see VEILLARD, A., and B. MUNSCH . . . . . 275
LEROY, G., voir ANDRÉ, J. M. . . . . 123
LEUPOLD, D.: Nichtnachbar-Matrixelemente in der HMO-Methode . . . . . 336
LISSILLOUR, R., voir GUERILLOT, C. R., et J. P. GANACHAUD . . . . . 230
—, voir GUERILLOT, C. R., et J. P. GANACHAUD . . . . . 375

MARÉCHAL, Y., and A. WITKOWSKI: The Infrared Spectra of Hydrogen-Bonded Crystals 116
MÅRTENSSON, O., and Y. ÖHRN: On the Complex Hybridization of Orbitals of $s$ and $p$ Type . . . . . 133
MEHLHORN, A., s. FABIAN, J., u. G. TRÖGER . . . . . 140
MESSER, K. P., s. HENSEN, K. . . . . 17
MEYER, A. Y.: Multi-Conformational Compounds with Two Absorbing Groups. III. The Non-Planar Phenyl-Ketone System . . . . . 401
MUNSCH, B., see VEILLARD, A., and J. M. LEHN . . . . . 275
MURRELL, J. N., see DITCHFIELD, R., and G. T. JONES . . . . . 253

Pagina

NAGAKURA, S., see Y. BANDO . . . . . 210
NARASIMHAN, P. T., see RAY, N. K. . . . . 268

ÖHRN, Y., see MÅRTENSSON, O. . . . . 133

PERKINS, P. G., see ARMSTRONG, D. R. . . . . 412
PEYERIMHOFF, S. D., and R. J. BUENKER: *Ab initio* Study of the Molecular Geometry and Properties of Nitrosyl Fluoride . . . . . 103
PUKANIC, G. W., D. R. FORSHEY, BR. J. D. WEGENER, and J. B. GREENSHIELDS: LCAO-MO-SCF-CI Semi-empirical $\pi$-Electron Calculations on Heteroaromatic Systems. I. Hydroxy Aromatic Compounds . . . . . 38
—, see D. R. FORSHEY, BR. J. D. WEGENER, and J. B. GREENSHIELDS . . . . . 288
PULLMAN, B., see JORDAN, F. . . . . 242
PULLMAN, A., see GIESSNER-PRETTRE, C. . . . . 279

RAY, N. K., and P. T. NARASIMHAN: Study of the Transition State in the Isomerization of *trans*-$N_2F_2$ to *cis*-$N_2F_2$ by Extended Hückel Theory . . . . . 268
ROUBAL, R. K., see HARRISS, D. K. . . . . 303

SCHMIDTKE, H.-H.: Die Bestimmung von Orbitalreihenfolgen in symmetrischen Molekülen auf Grund der Topologie und Struktur . . . . . 199
SCHOR, R., see WETTERMARK, G. . . . . 57
SILVER, B. L.: Spin Densities in Some Simple Parasemiquinones . . . . . 192
SOMMER, U.: Torsionsabhängige Beiträge zur Spin-Bahn-Kopplung in organischen Molekülen . . . . . 26
STAEMMLER, V., u. W. KUTZELNIGG: Die horizontale Korrelation in $\pi$-Elektronensystemen und ihre Beschreibung durch Elektronenpaarfunktionen. I. Das Butadien . . 67

TRINAJSTIĆ, N., see HERAK, J. N. . . . . 333
TRÖGER, G., s. FABIAN, J., u. A. MEHLHORN . . . . . 140

VANQUICKENBORNE, L. G., and S. P. MCGLYNN: Semi-Empirical Molecular Orbital Computations. VII. The Electronic Structure of Vanadyl Pentahydrate . . . . . 390
VAY, P.-M., voir GELUS, M., et G. BERTHIER . . . . . 182
VEILLARD, A., J. M. LEHN, and B. MUNSCH: An ab initio SCF-LCAO-MO Study of the Nitrogen Inversion Barriers in Ammonia and in Ethylenimine . . . . . 275

WAGNIÈRE, G.: Semiempirical Calculations on Triplet and Doublet States. A Comparison between the Restricted Open-Shell SCF and the Limited Configuration Interaction Method . . . . . 312
WEGENER, BR. J. D., see PUKANIC, G. W., D. R. FORSHEY, and J. B. GREENSHIELDS . . 38
—, see D. R. FORSHEY, G. W. PUKANIC, and J. B. GREENSHIELDS . . . . . 288
WETTERMARK, G., and R. SCHOR: The Electronic Structure and Spectrum of the Geometric Isomers of 1,4-Diphenyl-1,3-Butadiene . . . . . 57
WITKOWSKI, A., see MARÉCHAL, Y. . . . . 116

*Recensiones*

GLIEMANN, G., s. SCHLÄFER, H. L. . . . . 101
GOMBÁS, P.: Pseudopotentiale (Ref. W. H. E. SCHWARZ) . . . . . 100
HAMEKA, H. F.: Advanced Quantum Chemistry (Ref. M. SIMONETTA) . . . . . 278
JULG, A., et O. JULG: Exercices de Chimie Quantique (Ref. C. SANDORFY) . . . . . 278
JULG, O., voir JULG, A. . . . . 278
SCHLÄFER, H. L., u. G. GLIEMANN: Einführung in die Ligandenfeldtheorie (Ref. C. SCHÄFER) . . . . . 101

*Errata*

BINGEL, W. A.: A Physical Interpretation of the Cusp Conditions for Molecular Wave Functions . . . . . 99
KADURA, P.: Modellrechnungen zur symmetrischen Vierzentrenbindung. II. . . . . 344

SPRINGER-VERLAG
BERLIN · HEIDELBERG · NEW YORK

# Landolt-Börnstein

## Neue Serie / New Series

**Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik**
**Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology**

Gesamtherausgabe / Editor in Chief: **K.-H. Hellwege**

**Gruppe II:**
**Atom- und Molekularphysik**

**Band 3:**

# Lumineszenz organischer Substanzen

**Von A. Schmillen und R. Legler**

**Herausgeber: K.-H. Hellwege und A. M. Hellwege**

Mit 270 Abbildungen. VIII, 416 Seiten 4°
1967. Gebunden DM 196,—

**Inhaltsübersicht**

Lumineszenz organischer Substanzen: Einleitung. Absorption, Emission, Abklingdauer, Quantenausbeute, und weitere Angaben zur Fluoreszenz und Phosphoreszenz (Haupttabelle). Lumineszenzspektren. Speziellere Daten über die Lumineszenzzentren (Lumineszenzmoleküle einschließlich der Umgebung). Zwischenmolekulare Wechselwirkung im angeregten Zustand. Verwendung lumineszierender organischer Substanzen in der Szintillationstechnik. Die Zerstörung von Leuchtstoffen durch energiereiche Strahlung. Literaturverzeichnis. Substanzenverzeichnis.

■ **Bitte Prospekt anfordern!**

**Group II:**
**Atomic and Molecular Physics**

**Volume 3:**

# Luminescence of Organic Substances

**By A. Schmillen and R. Legler**

**Editors: K.-H. Hellwege and A. M. Hellwege**

With 270 figures. VIII, 416 pages 4to
1967. Cloth US $ 49.00

**Contents**

Luminescence of organic substances: Introduction. Absorption, emission, decay time, quantum efficiency, and further information on fluorescence and phosphorescence (main table). Luminescence spectra. Special data on the luminescence centers (luminescent molecules and their environment). Intermolecular processes in the excited state. Application of luminescent organic substances in the scintillation technique. Reduction of luminescence by radiation damage. References. List of substances.

■ **Prospectus on request!**

## Theoretica Chimica Acta

In the interest of speedy publication this journal is issued at frequent intervals, according to the material received. As a rule 5 numbers constitute one volume. The price is DM 76. – per volumes.

Special attention is drawn to the fact that sole copyright for all languages and countries is transferred to the publishers immediately the manuscript is accepted and published by them. It is a fundamental condition that no manuscript submitted shall have been or will be published elsewhere either at home or abroad.

Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microfilms, microphotos or other reproductions of a similar nature may be made of the journals, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The reproduction of registered names, trade marks, etc. in this journal, even if not specially indicated, does not warrant the assumption that such names, as defined by the laws affecting protection of trade marks, etc., may be regarded as uncontrolled and therefore for the free use of everybody.

---

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 76,—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

---

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît aux courts intervalles, dans la mesure des articels reçus. En générale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 76 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . ., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

Pagina

*Commentationes*

JUNGEN, M., u. H. LABHART: Zur Wechselwirkung von $\pi$- und $\sigma$-Elektronen in der Theorie ungesättigter Moleküle. I. Semiempirische LCAO-SCF-Rechnungen für $\pi$- und $\sigma$-Orbitale von Acrolein und Furan . . . . . 345

JUNGEN, M., u. H. LABHART: Zur Wechselwirkung von $\pi$- und $\sigma$-Elektronen in der Theorie ungesättigter Moleküle. II. Die $\pi$-$\sigma$-Wechselwirkung in der Pariser-Parr-Pople-Näherung . . . . . 366

GUERILLOT, C. R., J. P. GANACHAUD et R. LISSILLOUR: Calcul des facteurs de diffusion polycentriques sur une base de fonctions Gaussiennes . . . . . 375

COHEN, M., BRENDA H. DORRELL, and R. P. MCEACHRAN: Approximate Wave Functions for Excited States: Energies and Dipole Moments of the $2p\sigma$ State of $HeH^{+2}$ . . 382

VANQUICKENBORNE, L. G., and S. P. MCGLYNN: Semi-Empirical Molecular Orbital Computations. VII. The Electronic Structure of Vanadyl Pentahydrate . . . . . 390

MEYER, AMATZYA Y.: Multi-Conformational Compounds with Two Absorbing Groups. III. The Non-Planar Phenyl-Ketone System . . . . . 401

ARMSTRONG, D. R., and P. G. PERKINS: Calculation of $\sigma \rightarrow \pi^*$ and $\pi \rightarrow \sigma^*$ Transitions in Vinylboranes . . . . . 412

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Carl Ritter & Co., Wiesbaden

Printed in Germany

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3